



Tytuł pracy doktorskiej:

**Obliczenia wpływu entropii na strukturę elektronową, stabilność krystaliczną i wybrane własności fizyczne stopów wieloatomowych**

Promotor: prof. dr hab. inż. Janusz Tobała (emai: [tobola@ftj.agh.edu.pl](mailto:tobola@ftj.agh.edu.pl) )

W ostatnich latach obserwuje się rosnące zainteresowanie grup badawczych wieloatomowymi układami ciał stałych (przeważnie są to stopy nieuporządkowane), w których stabilność krystaliczna, preferencja uporządkowania strukturalnego oraz wynikająca stąd różnorodność własności fizycznych (transportowych, magnetycznych, mechanicznych) ma bezpośredni związek z wielkością i charakterem nieporządku chemicznego. Badanie takich stopów jest nie tylko podyktowane coraz szczegółowiej zdefiniowanymi zastosowaniami technologicznymi, ale przede wszystkim ma istotny aspekt poznawczy z uwagi na potrzebę zrozumienia (a z czasem też kontrolowania) zjawisk elektronowych na poziomie atomowym odpowiedzialnych za obserwowane w skali mezo- i makroskopowej zachowania fizyczne. Cennych informacji o możliwych związkach rodzaju i stopnia nieporządku, z własnościami fizycznymi takich układów, dostarczyły ostatnio prace dotyczące tzw. stopów o wysokiej entropii. W układach tych ważną rolę pełni nie tylko energia oddziaływań elektrostatycznych pomiędzy elektronami i jądrami, ale też czynniki entropowe takie jak entropia konfiguracyjna, elektronowa, magnetyczna czy fononowa (po części wszystkie związane z oddziaływaniami wewnątrz kryształu), determinujących energię swobodną układów ciał stałych.

Celem pracy byłyby badania struktury elektronowej, stabilności krystalicznej (poprzez analizę energii całkowitej oraz wkładów do entropii) oraz własności fizycznych (w szczególności magnetycznych i transportowych) wybranych grup stopów wieloatomowych (z naciskiem na stopy o wysokiej entropii) z zastosowaniem metod rozpraszania wielokrotnego (m.in. KKR oraz KKR-CPA).

Prace teoretyczne i obliczeniowe prowadzone byłyby we współpracy z francuską grupą eksperymentalną z Uniwersytetu w Rouen, zajmującą się pomiarami własności strukturalnych oraz magnetycznych stopów o wysokiej entropii.